

Bibliographische Beschreibung

Philipp Plänitz,

ab initio Berechnung elektronischer Eigenschaften von Dielektrika für neuartige Gate-Isolator-Schichtsysteme zukünftiger MOSFETs,

Dissertation an der Technischen Universität Chemnitz,

106 Seiten, 33 Abbildungen, 16 Tabellen

Schlagwörter

MOSFET, Gateoxide, high- k , Siliziumoxinitrid, Siliziumoxid, Dichtefunktionaltheorie, GW-Methode, *ab initio*, elektrische und dielektrische Eigenschaften, Grenzflächenzustandsdichte, Bandlücke, Bandverschiebung, Grenzflächenstrukturen, amorphe Strukturen

Referat

Die vorliegende Arbeit beschäftigt sich mit der Untersuchung der Anwendbarkeit von *ab initio* Methoden zur Berechnung von industriell relevanten Materialsystemen. Im Speziellen werden dabei Dielektrika für neuartige Gate-Isolator-Schichtsysteme zukünftiger MOSFETs betrachtet. Ziel der Arbeit ist dabei zunächst eine Evaluierung der *ab initio* Methoden am bekannten Gate-Material Siliziumoxinitrid. Die so hinsichtlich ihrer Applizierbarkeit untersuchten Methoden werden dann auf neuartige Gate-Isolatoren wie Titan-, Hafnium- und Gadoliniumoxid angewandt.

Ziel der Arbeit ist es, durch Vergleich der Ergebnisse der *ab initio* Methoden mit experimentellen Daten einen zuverlässigen und belastbaren methodischen Rahmen für die Vorhersage von Materialeigenschaften und damit eine virtuelle Materialauswahl zu entwickeln. Besonderes Augenmerk wird dabei auf industriell relevante Materialien gelegt. Solche Materialien zeichnen sich unter anderem durch komplexe chemische Zusammensetzung aus, weshalb für deren Beschreibung relativ große Einheitszellen benötigt werden.

Nach einer kurzen theoretischen Einführung in die genutzten Methoden und deren Grundlagen folgt deren Anwendung. Betrachtet werden insbesondere die elektrischen (z. B. Zustandsdichte und Bandlücke) und dielektrischen Eigenschaften z. B. der verschiedenen Materialien als Volumenmaterial sowohl für kristalline als auch amorphe Phasen und deren Bandverläufe an den Grenzflächen innerhalb des Schichtsystems. Am Ende der jeweiligen Kapitel folgt eine Zusammenfassung der physikalischen Ergebnisse und eine Beurteilung über die Applizierbarkeit der *ab initio* Methoden auf die betrachteten Materialien.

Keywords

MOSFET, gate oxide, high- k , silicon oxynitride, silicon oxide, density functional theory, GW-method, *ab initio*, electrical and dielectrical properties, interface states, band gap, bandoffset, interface structures, amorphous structures

Abstract

The present work investigates the applicability of *ab initio* methods on material systems of industrial relevance. The focus lies on dielectric materials for new types of gate-insulator-stacks of future MOSFETs. At first an evaluation of different *ab initio* methods has been done to prove their potential for the well known silicon oxynitride system. In a second step the most promising methods have been applied on new types of possible future gate insulators like titanium-, hafnium- or gadolinium oxide.

The aim of this work is to establish a reliable framework for virtual material screening by comparison of *ab initio* results and experimental data - in particular for material systems with industrial impact. Such materials distinguish themselves by complex chemical composition and resulting in the need of big unit cells for their description.

After a short theoretical introduction in the basics of the used methods, their application regarding the electric (e. g. density of states and band gap) and dielectric properties of bulk materials for crystalline and amorphous phases and band structures at interfaces for different stacks follows. At the end of each chapter a summary of the main physical results and valuation of the applicability of the investigated *ab initio* method for the studied material system is given.

Teile dieser Arbeit aus Abschnitt 3.1 wurden bereits veröffentlicht in:

- P. Plänitz, A. Martinez-Limia, M. Bouhassoune und C. Radehaus, *Ab initio calculation of electronic properties for dangling bond free nitridated silicon dioxide*, DPG Frühjahrstagung, 2006
- A. Martinez-Limia, P. Plänitz und C. Radehaus, *Ab initio structural and electronic properties of dangling-bond-free SiO_xN_y* , Phys. Rev. B, 73:165213, 2006

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	5
2	Theoretische Grundlagen der benutzten Methoden	9
2.1	Die Schrödingergleichung	9
2.2	Dichtefunktionaltheorie	11
2.3	Näherung mittels LDA	14
2.4	Pseudopotential-Methode	15
2.5	Ebene Wellen als Basissatz	17
2.6	Berechnung der totalen und lokalen Zustandsdichten	18
2.7	Strukturoptimierung / Molekulardynamik	19
2.8	Vielteilcheneffekte auf Basis der GW-Methode	20
2.9	Störungsrechnung / dielektrische Eigenschaften	21
2.10	FPLO	22
2.11	Berechnung des Bandverschiebung	24
3	Siliziumoxinitrid als Referenzsystem für die Anwendung von <i>ab initio</i> Methoden	27
3.1	Strukturelle und elektronische Eigenschaften der Volumen-Phasen von Siliziumoxinitrid	27
3.1.1	Strukturuntersuchung der kristallinen Phasen im SiO_xN_y System	28
3.1.2	Modellierung amorpher Phasen im SiO_xN_y System mit geringem Stickstoffgehalt	32
3.1.3	Einfluss der Stickstoffkonzentration auf die elektronischen Eigenschaften von SiO_xN_y	36
3.1.4	Zusammenfassung und Bewertung der verwendeten <i>ab initio</i> Methoden hinsichtlich ihrer Vorhersagekraft für high- k Materialien	41
3.2	Grenzflächeneigenschaften zwischen Siliziumoxinitrid und Silizium	44
3.2.1	Modellierung der Grenzflächenstruktur	44
3.2.2	Elektronische Eigenschaften an der Si/SiO_xN_y Grenzfläche	48
3.3	Abschließende Bewertung der Ergebnisse für Siliziumoxinitrid	51
4	Berechnung der elektronischen Eigenschaften verschiedener high-k Materialien	53
4.1	Vorauswahl	53
4.2	Hafniumoxid	56
4.2.1	Eigenschaften der HfO_2 Volumenphase	56
4.2.2	Eigenschaften der Grenzfläche zwischen HfO_2 und SiO_2	59
4.3	Untersuchung von Titan als Beimischung zu Siliziumoxid	64
4.3.1	Eigenschaften der Volumenphase	65

4.3.2	Grenzflächeneigenschaften	66
4.4	Gadoliniumoxid als high- k Material der zweiten Generation	70
4.4.1	Strukturelle Eigenschaften der Volumenphase	70
4.4.2	Zustandsdichte und Bandlücke der Volumenphase	71
4.5	Vergleich der berechneten high- k Materialien	74
5	Zusammenfassung	77
A	Die verwendeten Programmsysteme	79
A.1	ABINIT	79
A.2	CPMD	79
A.3	FPLO	80
B	Übersicht der im Rahmen der DFT-Berechnungen verwendeten Parameter und Methoden	81
B.1	Strukturoptimierungen	81
B.2	Elektronische Eigenschaften	81
B.3	Dielektrische Eigenschaften	82
	Abkürzungen, Notation und Konstanten	84
	Tabellenverzeichnis	85
	Abbildungsverzeichnis	88
	Literaturverzeichnis	99
	Selbstständigkeitserklärung	101
	Danksagung	103
	Tabellarischer Lebenslauf	105